УДК 539.194

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ И АДСОРБАТОВ НА БАЛЛИСТИЧЕСКУЮ ПРОВОДИМОСТЬ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК КРЕСЕЛЬНОГО ТИПА

© 2023 г. В. Б. Меринов^{1, 2*}, В. А. Домнин¹

¹Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", Москва, Россия ²Институт общей и неорганической химии Российской академии наук, Москва, Россия

**E-mail: Merinov.V.B@gmail.com* Поступила в редакцию 16.02.2022; после доработки 28.03.2022; принята в печать 20.04.2022

В рамках формализма Ландауэра-Буттикера и неортогонального гамильтониана сильной связи с параметризацией NTBM исследованы электронная трансмиссия и проводимость металлических нанотрубок кресельного типа субнанометрового диаметра. Мы рассмотрели влияние различных структурных дефектов (дефект Стоуна-Уэльса, моновакансия, замещающий атом азота) и адсорбированных на поверхности радикалов (H, O, OH, COOH) на электронные характеристики углеродных нанотрубок (УНТ). Установлено, что структурные дефекты и адсорбаты по-разному влияют на проводимость УНТ. При этом наблюдается два конкурирующих процесса. С одной стороны, это ослабление проводящих свойств УНТ из-за увеличения числа рассеивающих центров, а с другой – усиление проводимости за счет процессов структурной релаксации.

Ключевые слова: нанотрубки, сенсоры, электронная трансмиссия, формализм Ландауэра–Буттикера, модель сильной связи.

DOI: 10.31857/S0207401X23020127, EDN: IXGPXN

введение

С момента своего открытия в 1991 году одностенные углеродные нанотрубки (УНТ) активно привлекают внимание исследователей. Они представляют собой углеродный материал с трубчатой структурой, состоящий из свернутых графеновых листов. Существует множество способов получения УНТ: электродуговой синтез [1–3], лазерный синтез [4, 5], электронно- или ионно-лучевое испарение графита [6], испарение графита под действием солнечного света [7] и др.

Исследовательский интерес к УНТ обусловлен их уникальными свойствами. Геометрические параметры одностенных бездефектных УНТ полностью задаются парой целых чисел (*n*,*m*), которые называют индексами хиральности. Они обозначают относительное положение пары атомов графенового фрагмента, которые при скручивании друг на друга образуют трубку. В зависимости от индексов хиральности, УНТ могут иметь подобную металлам электронную структуру и электропроводность [8, 9] или проявлять полупроводниковые свойства [10, 11]. За счет своего строения и прочности связей между атомами углерода УНТ обладают исключительной прочностью на растяжение [12–14], теплопроводностью [15, 16] и упругостью [17, 18]. Кроме этого, их можно химически модифицировать, что позволяет добиваться разнообразия свойств УНТ, необходимых в различных областях [19–22]. В частности, УНТ применяются в качестве устройств биомедицинской инженерии [23–25], элементов новых аккумуляторов [26] и сенсоров парниковых и ядовитых газов [27–29].

Газовые сенсоры на основе УНТ привлекают внимание благодаря своей высокой чувствительности и селективности, что особенно важно для обнаружения опасных газов. Так, например, функционалазиация нанотрубок способствует селективной идентификации вредных веществ в питьевой воде или высокоэнергоемких материалов в газовой среде [30–33]. Также датчики на нанотрубках обладают такими преимуществами, как портативность, стабильность работы, низкий предел обнаружения, быстрое восстановление, низкие рабочая температура и температурное влияние на отклик [34-37]. Принцип действия сенсоров основывается на резком изменении свойств нанотрубки (как правило, электропроводности или оптического спектра) даже при небольшой концентрации адсорбировавшихся на ней газовых молекул. Эффективность УНТ связана с их низ-



Рис. 1. Структура дефектной нанотрубки. Центральная область, содержащая дефекты, рассматривается как рассеивающий центр (выделена белым), а бездефектные области играют роль полубесконечных периодических контактов (выделены серым).

кой размерностью (1D), обуславливающей большую удельную поверхность. Изготовленные сенсоры на основе УНТ позволяют детектировать различные газы: NO₂ при концентрации 10 ppm [28] и даже 50 ppb [28], CO при концентрации 2 ppm [28], NH₃ при концентрации 10 ppm [38].

Действие перечисленных сенсоров основано на измерении электрической проводимости НТ и ее изменении под действием адсорбатов. В настоящей работе мы теоретически исследуем влияние адсорбатов и характерных структурных дефектов на проводимость металлических нанотрубок. Один из реализованных экспериментов по баллистической проводимости нанотрубок осуществлялся в присутствии палладиевого омического контакта. Это обеспечивает хорошую воспроизводимость длины свободного пробега в 0.5 мкм при комнатной температуре, а в случае понижения температуры она увеличивалась до 4 мкм [39]. Рассматривались металлические нанотрубки кресельного типа с индексами хиральности (n, n), n == 4-6. Эти НТ обладают субнанометровым диаметром и могут быть получены как путем химического осаждения из паров (CVD) [2, 40], так и из многослойных УНТ [3, 41]. Они характеризуются высокой проводимостью по сравнению с трубками зигзагообразного типа и обладают повышенной химической активностью по отношению к радикалам благодаря сильной кривизне своей поверхности.

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Начальная геометрическая структура нанотрубок конструировалась при помощи программы Nanotube Modeler [42]. В центральной области трубки вручную "создавались" дефекты (моновакансии, дефекты Стоуна—Уэльса, замещающий атом азота) или присоединялись функциональные группы Н, О, ОН, СООН. Получившиеся структуры оптимизировались при помощи неортогональной модели сильной связи [43] с параметризацией [44], реализованной в программном пакете NTBM [45]. Релаксация проводилась до момента, когда остаточные силы становились

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 42 № 2 2023

меньше 0.001 эВ/Å. Модель NTBM обладает высокой производительностью и более высокой точностью, чем альтернативные полуэмпирические подходы [46]. Она верно предсказывает структуру, проводимость и электронные свойства нанотрубок [47, 48], а также родственных углеродных систем [49–52].

При расчетах проводимости и плотности энергетических состояний мы пользовались формализмом Ландауэра—Буттикера и неравновесными функциями Грина [53—56], как это описано в работах [43, 57—59]. Дефектный участок УНТ рассматривается как рассеивающий центр, а бездефектные участки выступают в роли полубесконечных периодических контактов, как показано на рис. 1. Дефектный участок описывается гамильтонианом HD и соответствующей матрицей перекрытия SD. Проводимость дефектной нанотрубки, *G*, рассчитывалась в рамках теории Ландауэра для квантового транспорта:

$$G(E) = G_0 T \left(\Gamma_L \underline{G} \Gamma_R \underline{G}^+ \right),$$

где G – проводимость, $G_0 = 2e/\hbar^2$ – квант проводимости, E – энергия падающего электрона, T – след соответствующей матрицы, \underline{G} – запаздывающая функция Грина, $\Gamma_{L/R}$ – матрицы, описывающие сцепления дефектной области с левым/правым полубесконечными контактами. Матрицы $\Gamma_{L/R}$ связаны с матрицами "самоэнергий" контактов соотношениями

$$\Gamma_{L,R} = i \left(\Sigma_{L,R} - \Sigma_{L,R}^+ \right).$$

Матрицы "самоэнергий" определялись через транспортные матрицы переноса:

$$\Sigma_{L} = [(E + i\eta)S_{LD} - H_{LD}]^{+} \{(E + i\eta)S_{L}^{0} - H_{L}^{0} + [(E + i\eta)S_{L}^{01} - H_{L}^{01}]^{+}\overline{T}\}^{-1} [(E + i\eta)S_{LD} - H_{LD}],$$

$$\Sigma_{L} = [(E + i\eta)S_{DR} - H_{DR}] \{(E + i\eta)S_{R}^{0} - H_{R}^{0} + [(E + i\eta)S_{R}^{01} - H_{R}^{01}]^{+}T\}^{-1} [(E + i\eta)S_{DR} - H_{DR}]^{+},$$

где $S_{L/R}$ – собственные энергии прибор-контактной системы; η – произвольно малая величина (мы использовали значение 10^{-6} эВ); $S_{LD/DR}$ и $H_{LD/DR}$ – матрицы перекрытия и гамильтониана, описывающие спаривание рассеивающего центра (D) с элементарной ячейкой левого/правого контакта; $S_{L/R}^0$ и $H_{L/R}^0$ – матрицы перекрытия и гамильтониана элементарной ячейки контакта; $S_{L/R}^{01}$, $H_{L/R}^{01}$ – матрицы спаривания соседних элементарных ячеек контакта; $T_{L/R}$ – матрицы переноса контактов, которые вычисляются через вышеперечисленные матрицы с помощью итеративной процедуры [46, 60–62]. Запаздывающая функция Грина рассчитывается по формуле

$$\underline{G}(E) = \left[(E + i\eta) S_D - H_D - \Sigma_L - \Sigma_R \right]^{-1}$$

Все гамильтонианы и матрицы перекрытия определялись в рамках той же параметризации – NTBM. Аналогичный подход, основанный на сочетании модели NTBM с формализмом Ландауэра–Буттикера, ранее использовался в работе [57] для расчета проводимости допированных кубиленовых цепочек.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Влияние дефектов и функциональных групп на проводимость УНТ

На первом этапе мы рассмотрели бездефектную УНТ кресельного типа с индексами хиральности (5, 5). Коэффициент ее трансмиссии вблизи уровня Ферми равен двум, что соответствует баллистической проводимости $2G_0$; такое же значение было получено и обосновано в работе [63]. Наличие дефектов и функциональных групп во всех случаях понижает трансмиссию, поскольку эти неоднородности работают как рассеивающие центры. Изменения проводимости в зависимости от типа и количества неоднородностей показаны в табл. 1 и на рис. 2. Оно рассчитывалось как среднее значение трансмиссии в области $E_F \pm kT$, где E_F — энергия Ферми, kT = 26 мэВ.

При рассмотрении двух функциональных групп они помещались в пара-положение, которое наиболее энергетически выгодно, согласно исследованию, проведенному в работе [64]. При рассмотрении нескольких замещающих атомов азота они помещались на противоположных сторонах УНТ, поскольку они эффективно отталкиваются друг от друга [65]. Также располагались и другие дефекты – вакансии и дефекты Стоуна–Уэльса.

Из табл. 1 видно, что разные неоднородности по-разному влияют на проводимость УНТ. Ато-

Таблица 1. Зависимость проводимости G/G_0 УНТ типа
(5,5) от наличия функциональных групп (Й, О, ОН,
СООН) или структурных дефектов (моновакансий V, де-
фектов Стоуна-Уэльса SW, замещающих атомов азота N).
Количество функциональных групп или дефектов в рас-
сеивающей области нанотрубки составляло $m = 1 - 3$

Тип неоднородностей	т	G/G_0
Н	1	1.28
	2	1.50
Ν	1	1.99
	2	1.98
	3	1.93
0	1	1.86
	2	1.46
ОН	1	0.90
	2	1.54
SW	1	1.79
	2	1.33
V	1	1.51
	2	0.71
СООН	1	1.17
	2	1.44

мы азота практически не искажают структуру трубки и очень слабо изменяют ее проводимость. Самое значительное снижение проводимости вызывают вакансии и гидроксильные группы. В случае атомов водорода и вакансий наблюдается немонотонная зависимость проводимости от числа дефектов: пара дефектов "компенсируют" структурные искажения, вызываемые каждым дефектом по отдельности, что приводит к некоторому восстановлению проводимости. Иногда два дефекта частично компенсируют искажения, вызванные друг другом, поэтому проводимость увеличивается при осаждении пары дефектов.

В результате независимо проявляются два конкурирующих процесса. С одной стороны, проводимость снижается из-за увеличения числа рассеивающих центров, а с другой, напротив, наблюдается усиление проводящих свойств за счет структурной релаксации, что и объясняет частое осаждение функциональных групп парами в реальных системах [66]. Искажение геометрической формы нанотрубки под действием различных дефектов и адсорбатов может служить физическим принципом, обеспечивающим селективность сенсоров на основе УНТ.



Рис. 2. Электронная трансмиссия G/G_0 через УНТ типа (5,5) как функция энергии электрона E (уровень Ферми E_F выбран за начало отсчета): a – бездефектная трубка (сплошная серая линия) и трубка с двумя моновакансиями (точечная черная линия); δ – трубка, функционализированная двумя атомами Н (сплошная серая линия) и двумя группами ОН (точечная черная линия); δ – трубка с тремя замещающими атомами азота (сплошная серая линия) и двумя дефектами Стоуна–Уэльса (точечная черная линия); ϵ – трубка, функционализированная двумя атомами О (сплошная серая линия) и одной группой СООН (точечная черная линия).

Влияние диаметра дефектной УНТ на ее проводимость

В экспериментах по синтезу субнанометровых УНТ трудно контролировать их диаметр. Как правило, удается синтезировать массив трубок, диаметры которых распределены вблизи желаемого значения. Чтобы оценить влияние диаметра дефектной нанотрубки на ее проводимость, мы рассмотрели аналогичные рассеивающие центры в нанотрубках с индексами хиральности (4,4) и (6,6). На рис. З показано несколько характерных зависимостей электронной трансмиссии дефектных УНТ от энергии электрона *E*. Более узкие нанотрубки характеризуются более широкой областью энергий, при которых G/G_0 близко к двум. Однако эти различия слабо влияют на трансмиссию вблизи уровня Ферми при разумных температурах kT < 100 мэВ, соответствующих экспери-

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 42 № 2 2023



Рис. 3. Электронная трансмиссия G/G_0 через УНТ типов (4,4) и (6,6) как функция энергии электрона E(уровень Ферми E_F выбран за начало отсчета): a – бездефектная трубка (6,6) (сплошная серая линия) и (4,4) (точечная черная линия); δ – трубка (6,6) с моновакансией (сплошная серая линия) и трубка (4,4) с моновакансией (точечная черная линия); a – трубка (6,6), функционализированная атомом водорода Н (сплошная серая линия) и трубка (4,4), функционализированная атомом водорода Н (точечная черная линия).

ментальным условиям. Таким образом, небольшое изменение диаметра нанотрубки незначительно влияет на ее проводимость.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Несмотря на синтез множества новых низкоразмерных материалов, нанотрубки и другие углеродные структуры остаются наиболее доступными и часто используемыми структурами, а технология их получения и обработки хорошо развита и постоянно совершенствуется. Измерение баллистической проводимости индивидуальных нанотрубок и создание устройств на их основе постепенно становится рутинной процедурой. Кроме того, нанотрубки служат структурными элементами или прекурсорами для более сложных систем — различных композитов, колонного графена, углеродных пиподов и др.

Как и для многих других материалов, именно дефекты определяют реально наблюдаемые свойства нанотрубок. В рамках настояшей работы мы показали, как распространенные функциональные группы и обычные для УНТ дефекты понижают их баллистическую проводимость. В частности, баллистическая проводимость кресельных нанотрубок с индексом хиральности n = 4, 5, 6 соответствует приблизительно 2G₀. Обнаруженная разница во влиянии различных неоднородностей на проводимость может послужить основой для селективности сенсоров на основе УНТ, которая сопровождается двумя противоположными процессами, а именно увеличением числа рассеивающих центров, снижающих проводимость нанотрубки, и структурной релаксации, приводящей к усилению проводящих свойств.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-00154; https://rscf.ru/ project/22-23-00154.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Iijima S.* // Nature. 1991. V. 354. P. 56; https://doi.org/10.1038/354056a0
- 2. *Rahman G., Najaf Z., Mehmood A. et al.* // C. 2019. V. 5. № 3. P. 3;
 - https://doi.org/10.3390/c5010003
- Li M., Liu X., Zhao X. et al. // Single-Walled Carbon Nanotubes / Eds. Li Y., Maruyama S. Springer Intern. Publ., 2019. P. 25; https://doi.org/10.1007/978-3-030-12700-8 2
- Guo T., Nikolaev P., Rinzler A.G. et al. // J. Phys. Chem. 1995. V. 99. P. 10694; https://doi.org/10.1021/j100027a002
- Guo T., Nikolaev P., Thess A. et al. // Chem. Phys. Lett. 1995. V. 243. P. 49; https://doi.org/10.1016/0009-2614(95)00825-O
- 6. Kosakovskaya Z.Y., Chernozatonskii L.A., Fedorov E.F. // Pri'sma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 1992. V. 56. P. 26.

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 42 № 2 2023

- Journet C., Bernier P. // Appl. Phys. A. 1998. V. 67. P. 1; https://doi.org/10.1007/s003390050731
- Mintmire J.W., Dunlap B.I., White C.T. // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 68. P. 631; https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.68.631
- 9. Tans S.J., Devoret M.H., Dai H. et al. // Nature. 1997.
 V. 386. P. 474; https://doi.org/10.1038/386474a0
- Hamada N., Sawada S., Oshiyama A. // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 68. P. 1579; https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.68.1579
- Wilder J.W.G., Venema L.C., Rinzler A.G. et al. // Nature. 1998. V. 391. P. 59; https://doi.org/10.1038/34139
- Min-Feng Y., Oleg L., J. D.M. et al. // Science. 2000. V. 287. P. 637; https://doi.org/10.1126/science.287.5453.637
- Baimova J.A., Fan Q., Zeng L. et al. // J. Nanomater. 2015. V. 2015. P. 186231; https://doi.org/10.1155/2015/186231
- 14. Annin B.D., Baimova Y.A., Mulyukov R.R. // J. Appl. Mech. Tech. Phys. 2020. V. 61. P. 834; https://doi.org/10.1134/S0021894420050193
- Berber S., Kwon Y.-K., Tománek D. // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 84. P. 4613; https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.4613
- Kochaev A. // Phys. Rev. B. 2017. V. 96. P. 155428; https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.155428
- Kim P., Shi L., Majumdar A. et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87. P. 215502; https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.215502
- Kochaev A., Katin K., Maslov M. // Comput. Condens. Matter. 2019. V. 18. P. e00350; https://doi.org/10.1016/j.cocom.2018.e00350
- Ashraf M.A., Liu Z., Najafi M. // Rus. J. Phys. Chem. B. 2020. V. 14. № 2. P. 217; https://doi.org/10.1134/S1990793120020189
- Дышин А.А., Кузьмиков М.С., Алешонкова А.А. и др. // Сверхкрит. флюиды: теория и практика. 2021. Т. 16. С. 3; https://doi.org/10.1134/S1990793121080030
- Zuev Y.I., Vorobei A.M., Parenago O.O. // Rus. J. Phys. Chem. B. 2021. V. 15. № 7. P. 1107; https://doi.org/10.1134/S1990793121070174
- 22. Vorobei A.M., Zuev Y.I., Dyshin A.A. et al. // Rus. J. Phys. Chem. B. 2021. V. 15. № 8. P. 1314; https://doi.org/10.1134/S1990793121080169
- Bianco A., Kostarelos K., Partidos C.D. et al. // Chem. Commun. 2005. P. 571; https://doi.org/10.1039/B410943K
- 24. Balasubramanian K., Burghard M. // Small. 2005. V. 1. P. 180;
 - https://doi.org/10.1002/smll.200400118
- 25. *Harrison B.S., Atala A.* // Biomaterials. 2007. V. 28. P. 344; https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2006.07.044
- 26. *de las Casas C., Li W.* // J. Power Sources. 2012. V. 208. P. 74;
 - https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2012.02.013
- Jeong H.Y., Lee D.-S., Choi H.K. et al. // Appl. Phys. Lett. 2010. V. 96. P. 213105; https://doi.org/10.1063/1.3432446

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 42 № 2 2023

- Leghrib R., Pavelko R., Felten A. et al. // Sens. Actuators, B. 2010. V. 145. P. 411; https://doi.org/10.1016/j.snb.2009.12.044
- Kumar S., Pavelyev V., Mishra P. et al. // Sens. Actuators, A. 2018. V. 283. P. 174; https://doi.org/10.1016/j.sna.2018.09.061
- Doshi M., Fahrenthold E.P. // Surf. Sci. 2022. V. 717. P. 121998; https://doi.org/10.1016/j.susc.2021.121998
- Eskandari P., Abousalman-Rezvani Z., Roghani-Mamaqani H. et al. // Adv. Colloid Interface Sci. 2021. V. 294. P. 102471; https://doi.org/10.1016/j.cis.2021.102471
- 32. Guo C., Wang Y., Wang F. et al. // Nanomater. 2021. V. 11. № 9. 2353; https://doi.org/10.3390/nano11092353
- 33. *da Silva Alves D.C., Healy B., Pinto L.A. de A. et al.* // Molecules. 2021. V. 26. № 3. 594; https://doi.org/10.3390/molecules26030594
- 34. *Hu J., Yu J., Li Y. et al.* // Nanomater. 2020. V. 10. № 4. 664; https://doi.org/10.3390/nano10040664
- Jones R.S., Kim B., Han J.-W. et al. // J. Phys. Chem. C. 2021. V. 125. P. 9356; https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c11451
- Chang X., Chen L., Chen J. et al. // Adv. Compos. Hybrid Mater. 2021. V. 4. P. 435; https://doi.org/10.1007/s42114-021-00292-3
- Ridhi R., Chouksey A., Gautam S. et al. // Sensors Actuators, B. 2021. V. 334. P. 129658; https://doi.org/10.1016/j.snb.2021.129658
- Jian J., Guo X., Lin L. et al. // Ibid. 2013. V. 178. P. 279; https://doi.org/10.1016/j.snb.2012.12.085
- 39. Mann D., Javey A., Kong J. et al. // Nano Lett. 2003. V. 3. P. 1541; https://doi.org/10.1021/nl0347000
- 40. Cui K., Kumamoto A., Xiang R. et al. // Nanoscale. 2016. V. 8. P. 1608; https://doi.org/10.1039/C5NR06007A
- Hong B.H., Small J.P., Purewal M.S. et al. // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2005. V. 102. P. 14155 LP; https://doi.org/10.1073/pnas.0505219102
- 42. *Nanotube Modeler*; http://jcrystal.com/products/wincnt/
- 43. Катин К.П., Маслов М.М. // Хим. физика. 2011. Т. 30. № 10. С. 41; https://doi.org/10.1134/S1990793111090181
- 44. Maslov M., Podlivaev A., Katin K. // Mol. Simul. 2016. V. 42. P. 305; https://doi.org/10.1080/08927022.2015.1044453
- 45. Katin K.P., Grishakov K.S., Podlivaev A.I. et al. // J. Chem. Theory Comput. 2020. V. 16. P. 2065; https://doi.org/10.1021/acs.jctc.9b01229
- 46. Markussen T., Rurali R., Brandbyge M. et al. // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. P. 245313; https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.245313
- 47. Prudkovskiy V, Berd M., Pavlenko E. et al. // Carbon. 2013. V. 57. P. 498; https://doi.org/10.1016/j.carbon.2013.02.027

- Grishakov K.S., Katin K.P., Maslov M.M. // Adv. Phys. Chem. 2016. V. 2016. P. 1862959; https://doi.org/10.1155/2016/1862959
- 49. Podlivaev A.I., Openov L.A. // Semiconductors. 2017. V. 51. P. 636; https://doi.org/10.1134/S1063782617050219
- Podlivaev A.I., Openov L.A. // Phys. Solid State. 2015. V. 57. P. 2562; https://doi.org/10.1134/S1063783415120276
- Katin K.P., Maslov M.M. // J. Phys. Chem. Solids. 2017. V. 108. P. 82; https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2017.04.020
- Katin K.P., Shostachenko S.A., Avkhadieva A.I. et al. // Adv. Phys. Chem. 2015. V. 2015. P. 506894; https://doi.org/10.1155/2015/506894
- 53. *Büttiker M.* // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 57. P. 1761; https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.57.1761
- 54. Landauer R. // Philos. Mag. A J. Theor. Exp. Appl. Phys. 1970. V. 21. P. 863; https://doi.org/10.1080/14786437008238472
- 55. Büttiker M., Imry Y., Landauer R. et al. // Phys. Rev. B. 1985. V. 31. P. 6207; https://doi.org/10.1103/PhysRevB.31.6207
- 56. Fisher D.S., Lee P.A. // Phys. Rev. B. 1981. V. 23. P. 6851; https://doi.org/10.1103/PhysRevB.23.6851

- Katin K.P., Maslov M.M. // Adv. Condens. Matter Phys. 2015. V. 2015. P. 754873; https://doi.org/10.1155/2015/754873
- Slepchenkov M.M., Shmygin D.S., Zhang G. et al. // Carbon. 2020. V. 165. P. 139; https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.04.069
- 59. Glukhova O.E., Shmygin D.S. // J. Nanotechnol. 2018. V. 9. P. 1254; https://doi.org/10.3762/bjnano.9.117
- Sancho M.P.L., Sancho J.M.L., Rubio J. // J. Phys. F Met. Phys. 1984. V. 14. P. 1205; https://doi.org/10.1088/0305-4608/14/5/016
- 61. *Nardelli M.B.* // Phys. Rev. B. 1999. V. 60. P. 7828; https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.7828
- Sancho M.P.L., Sancho J.M.L., Sancho J.M.L. et al. // J. Phys. F Met. Phys. 1985. V. 15. P. 851; https://doi.org/10.1088/0305-4608/15/4/009
- 63. White C.T., Todorov T.N. // Nature. 1998. V. 393. P. 240; https://doi.org/10.1038/30420
- 64. Salem M.A., Katin K.P., Kaya S. et al. // Physica. E. 2020. V. 124. P. 114319; https://doi.org/10.1016/j.physe.2020.114319
- 65. *Katin K.P., Maslov M.M.* // Ibid. 2018. V. 96. P. 6; https://doi.org/10.1016/j.physe.2017.09.021
- 66. Goler S., Coletti C., Tozzini V. et al. // J. Phys. Chem. C. 2013. V. 117. P. 11 506; https://doi.org/10.1021/jp4017536